

**Министерство науки и высшего образования Российской Федерации**  
федеральное государственное автономное образовательное учреждение  
высшего образования



**«НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
ТОМСКИЙ ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ»**

---

Направление подготовки/профиль 09.06.01 Информатика и вычислительная техника / 05.13.06 Автоматизация и управление технологическими процессами и производствами (атомная промышленность)

Школа Инженерная школа ядерных технологий

Отделение Ядерно-топливного цикла

**Научный доклад об основных результатах подготовленной  
научно-квалификационной работы**

Тема научного доклада
<b>Разработка аппаратно-программного комплекса автоматизации процесса компьютерного моделирования материалов</b>

УДК 004.3:004.415.2:004.92:620.22

Аспирант

Группа	ФИО	Подпись	Дата
A6-38	Попов А.С.		25.05.2020

Руководитель профиля подготовки

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Профессор	Ливенцов С.Н.	д.т.н., профессор		

Руководитель отделения

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Рук. ОЯТЦ	Горюнов А.Г.	д.т.н., профессор		

Научный руководитель

Должность	ФИО	Ученая степень, звание	Подпись	Дата
Доцент	Обходский А.В.	к.т.н., доцент		26.05.2020

Томск – 2020 г.

**АННОТАЦИЯ К НАУЧНО-КВАЛИФИКАЦИОННОЙ РАБОТЕ**  
**«Разработка аппаратно-программного комплекса автоматизации процесса**  
**компьютерного моделирования материалов»**

*Автор: Попов Александр Сергеевич, аспирант гр. А6-38ОЯТЦ ИЯТШ ТПУ*  
*Научный руководитель: Обходский Артем Викторович, ДоцентОЯТЦ*  
*ИЯТШ ТПУ*

Универсальный метод прогнозирования свойств атомных структур позволит проводить непрерывный цикл вычислений с целью поиска материала, подходящего по тем или иным характеристикам. Устранить проблемы методов квантовой химии – отсутствие универсальности и требование значительных вычислительных ресурсов позволяют модели на основе нейронных сетей, поскольку в настоящий момент накопилось достаточное количество данных для обучения нейронных сетей, имеется необходимый инструментарий для ее создания и проведены исследования, позволяющие определить направление разработок в данной области.

При использовании нейронной сети возникает проблема – поиск необходимого и достаточного описания материала при использовании суррогатной модели с целью дальнейшего нейросетевого анализа. В настоящей работе представлен алгоритм функционирования новой суррогатной модели, а также его верификация с помощью нейронной сети.

Алгоритм функционирования обеспечивает инвариантность выборки относительно поворота структуры, ее перемещения и перестановки одних и тех же элементов внутри структуры. Применим к любому типу решетки, размеру и количеству атомов внутри решетки, поддается распараллеливанию.

В качестве нейронной сети выбран двуслойный персептрон, параметры настройки которого были найдены эмпирически и подробно описаны в работе. Выборка для обучения составляла 8000 наборов, контрольная выборка – 800 наборов. Наилучший результат достигнут при 200 тысячах эпох обучения.

Представленная суррогатная модель в составе аппаратно-программного комплекса показала свою эффективность при расчете полной энергии решетки элементов набора бинарных сплавов ВА10-18. Были получены параметры настройки суррогатной модели и нейронной сети, при которых погрешность составляет 0,373% (2,9 МэВ/атом). Нейронная сеть с относительно высокой точностью предсказала полную энергию решетки по ее геометрическим параметрам.

Исследование демонстрирует перспективность нейросетевого анализа данных в материаловедении. Универсальность метода позволяет говорить о его применимости в аппаратно-программных комплексах моделирования материалов для автоматизации научных исследований.